Index

Commentationes et Relationes

Amos, A.T., Burrows, B.L.: Perturbation Theory for Excited States of Molecules. 2. Electric Polarizabilities 327
Aslangul, C., Veillard, A., Daudel, R., Gallais, F.: Etude quantitative de la distinction entre une liaison de covalence et une liaison de coordination: les molécules de borazane et d'aminoborane 211
Asselt, N.P. van, s. Brugman, C.J.M., et al. 105

Basilevsky, M.V., Tikhomirov, V.A., Chlenov, I.E.: The Potential Surfaces for the Addition Reactions of π-Systems 75
Benson, H.G., Hudson, A.: Applications of the INDO Method to Some Radicals Containing Second Row Elements 259
Boon, M.R.: Bond Length Alternation in Infinitely Long Conjugated Polyacenes . . . 109
Boyd, D.B.: Direct Comparison of EH and CNDO Charge Distributions for Adenine . 383
Brabant, C., Salahub, D.R.: Doubly Excited Configurations in Modified CNDO and INDO Methods 285
Breen, D.L., Flurry, R.L., Jr.: Semi-Empirical Molecular Orbital Calculations on Some Tautomers of Cytosine 138
Brugman, C.J.M., van Asselt, N.P., Rettschnick, R.P.H., Hoytink, G.J.: Molecules in Molecules Calculations on Decacyclene 105
Burrows, B.L., s. Amos, A.T. 327

Chlenov, I.E., s. Basilevsky, M.Y., et al. 75
Csizmadia, I.G., s. Hopkinson, A.C., et al. 369

Damrauer, R., s. Williams, D.R. 195
Daudel, R., s. Aslangul, C., et al. 211
David, D.-J.: Détermination de bases de Gaussiennes optimales pour les molécules. III. Remarques sur les bases atomiques de départ et application à la molécule de méthane 226
Del Re, G., Momicchioli, F., Rastelli, A.: On the Role of Core Repulsion in the Prediction of the Energy Levels of π-Conformers 316
Diercksen, G.H.F., Kraemer, W.P.: SCF MO LCGO Studies on the Hydration of Ions: The Systems H^+H_2O, Li^+H_2O, and Na^+H_2O 387
— s. Kraemer, W.P. 393
— s. Kraemer, W.P. 398
Drago, R.S., s. Strange, R.S., et al. 103
Duke, B.J.: The 3-Centre Bond — Non Paired Spatial Orbital Method (NPSO) 175
Dumbacher, B.: Ab Initio SCF and CI Calculations on the Barrier to Internal Rotation of 1,3-Butadiene 346

Eliezer, I., Moualem, A.: Perturbation Treatment of Hartree-Fock Equations for Resonance States of Three Electron Atoms and Ions 39

Flurry, R.L., Jr.: Molecular Orbital Theory of Electron Donor-Acceptor Complexes. IV. A Self-Consistent Linear Combination of Molecular Orbitals Approximation . . . 1
— s. Breen, D.L. 138

Gallais, F., s. Aslangul, C., et al. 211
Gamba, A., Tantardini, G., Simonetta, M.: Application of the MIM Method to the Study of Electronic Absorption Bands Involving Triplet States in Hydrocarbons . . 336
Gaskell, A.J., s. Palmer, M.H. 62
Gelius, U., Roos, B., Siegbahn, P.: MO-SCF-LCAO Studies of Sulphur Compounds, II. The Sulphate Ion 59

Halton, M.P.: Extended Hückel Calculations on the Bonding in Oxyhaemoglobin . . . 208
Harris Loew, G., Steinberg, D.A.: Molecular Orbital Calculations of the Active Site Complex of Two Iron Ferredoxins. I. Energy-Conformation Studies 239
Hirst, D.M.: Application of the INDO-MO Method to the Calculation of Hyperfine Splitting Constants for Styrene Radical Anions 378
Hopkinson, A.C., Yates, K., Csizmadia, I.G.: A Theoretical Study of the Heats of Formation of Some Small Molecules Using Non-Empirical Wavefunctions 369
Hoytink, G.J., s. Brugman, C.J.M., et al. 105
Hudson, A., s. Benson, H.G. 259

Jug, K.: β Parameters for Non-Nearest Neighbors 93
— Operator Equations in Approximate Molecular Orbital Theories 183

KATRIEL, J.: A Study of the Interpretation of Hund's Rule . . . 309
KOBAYASHI, T., s. YOSHIDA, Z. . . . 67
KÖNIG, E., KREMER, S.: Exact Spin-Pairing Energies at the Crossovers in Octahedral d^4, d^5, d^6, and d^7 Transition Metal Complexes . . . 12
KRAEMER, W. P., DIERCKSEN, G. H. F.: SCF MO LCGO Studies on the Hydration of Ions: The System $Li^+ \cdot 2H_2O$ . . . 393
— — SCF MO LCGO Studies on Hydrogen Bonding: The System $(HOHOH)^-$ . . . 398
— s. DIERCKSEN, G. H. F. . . . 387
KREMER, S., s. KÖNIG, E. . . . 12

LIN, S. H.: Theory of Delayed Thermal Fluorescence . . . 98

MILLER, K. M., WANG, C.-M., MUSULIN, B.: A Simplified Weinbaum Function . . . 291
MOMICCHIOLI, F., s. DEL RE, G., et al. . . . 316
MOUALEM, A. s. ELIEZER, I. . . . 39
MULLEN, P. A., ORLOFF, M. K.: The Electronic Spectrum of Acrylonitrile . . . 278
MUSULIN, B., s. MILLER, K. M., et al. . . . 291

ORLOFF, M. K., s. MULLEN, P. A. . . . 278

PALMER, M. H., GASKELL, A. J.: *Ab Initio* Molecular Orbital Calculations. I. Minimal Basis Calculations on Furan, Pyrrole and 1,2,5-Oxadiazole . . . 52
POLITZER, P.: Properties of Atoms in Molecules. III. Atomic Charges and Centers of Electronic Charge in Some Heteronuclear Diatomic Molecules . . . 203

RASTELLI, A., s. DEL RE, G., et al. . . . 316
RAY, N. K.: Theoretical Study of the Structure of Protonated Ethane ($C_2H_7^+$) . . . 111
REES, B., VEILLARD, A., WEISS, R.: Structure électronique des ions méthyloxocarbonium et isopropyloxocarbonium . . . 266
REINSCH, E.-A.: Das Kastenmodell als Grundlage für ein *ab initio* Verfahren. I. Skizzierung . . . 155
RETTSCHNICK, R. P. H., s. BRUGMAN, C. J. M., et al. . . . 105
ROOS, B., s. GELIUS, U., et al. . . . 59

SALAHUB, D. R., s. BRABANT, C. . . . 285
SCHWARZ, W. H. E.: Modifiziertes Statistisches Atommodell . . . 21
— The General Form of Pseudopotential Operators . . . 147
SIEGBAHN, P., s. GELIUS, U., et al. . . . 59
SIMONETTA, M., s. GAMBA, A., et al. . . . 336
SIMPSON, W. T.: Vertical Excitation as a Transient Phenomenon . . . 295
STEINBERG, D. A., s. HARRIS LOEW, G. . . . 239
STRANGE, R. S., WHITE, W. D., DRAGO, R. S.: Atomic SCF Valence Orbitals for First Transition Series Metals . . . 103

TANTARDINI, G., s. GAMBA, A., et al. . . . 336
TIKHOMIROV, V. A., s. BASILEVSKY, M. V., et al. . . . 75

VEILLARD, A., s. ASLANGUL, C., et al. . . . 211
— s. REES, B., et al. . . . 266

WAGNER, E. L.: *Ab Initio versus* CNDO Barrier Calculations. I. N_2H_4 and N_2F_4 . . . 115
— *Ab Initio versus* CNDO Barrier Calculations. II. P_2H_4 and P_2F_4 . . . 127
WANG, C.-M., s. MILLER, K. M., et al. . . . 291
WASILEWSKI, J., WOŹNICKI, W.: Some Remarks on the Calculations of Hyperfine Splittings in the ESR Spectra of Conjugated Radicals . . . 360
WEISS, R., s. REES, B., et al. . . . 266
WHITE, W. D., s. STRANGE, R. S., et al. . . . 103
WILLIAMS, D. R., DAMRAUER, R.: Molecular Orbital Calculations on Substituted Carbodiimides . . . 195
WOŹNICKI, W., s. WASILEWSKI, J. . . . 360

YATES, K., s. HOPKINSON, A. C., et al. . . . 369
YOSHIDA, Z., KOBAYASHI, T.: SCFMO Calculation of the 1:1 Charge-Transfer Complex between Benzene and p-Benzoquinone by the Variable Integrals Method II . . . 67

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 4 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 120.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 4 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 120,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à de courts intervalles, suivant les articles reçus. En général un volume se compose de 4 fascicules. Le prix de chaque volume est de 120 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que des ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 23 Fasc. 4

Commentationes

SIMPSON, W. T.: Vertical Excitation as a Transient Phenomenon 295

KATRIEL, J.: A Study of the Interpretation of Hund's Rule 309

DEL RE, G., MOMICCHIOLI, F., RASTELLI, A.: On the Role of Core Repulsion in the Prediction of the Energy Levels of π-Conformers 316

AMOS, A. T., BURROWS, B. L.: Perturbation Theory for Excited States of Molecules. 2. Electric Polarizabilities 327

GAMBA, A., TANTARDINI, G., SIMONETTA, M.: Application of the MIM Method to the Study of Electronic Absorption Bands Involving Triplet States in Hydrocarbons . . 336

DUMBACHER, B.: Ab Initio SCF and CI Calculations on the Barrier to Internal Rotation of 1,3-Butadiene 346

WASILEWSKI, J., WOŹNICKI, W.: Some Remarks on the Calculations of Hyperfine Splittings in the ESR Spectra of Conjugated Radicals 360

Relationes

HOPKINSON, A. C., YATES, K., CSIZMADIA, I. G.: A Theoretical Study of the Heats of Formation of Some Small Molecules Using Non-Empirical Wavefunctions 369

HIRST, D. M.: Application of the INDO-MO Method to the Calculation of Hyperfine Splitting Constants for Styrene Radical Anions 378

BOYD, D. B.: Direct Comparison of EH and CNDO Charge Distributions for Adenine . 383

DIERCKSEN, G. H. F., KRAEMER, W. P.: SCF MO LCGO Studies on the Hydration of Ions: The Systems H^+H_2O, Li^+H_2O, and Na^+H_2O 387

KRAEMER, W. P., DIERCKSEN, G. H. F.: SCF MO LCGO Studies on the Hydration of Ions: The System $Li^+ \cdot 2H_2O$ 393

KRAEMER, W. P., DIERCKSEN, G. H. F.: SCF MO LCGO Studies on Hydrogen Bonding: The System $(HOHOH)^-$ 398

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237

Telephone (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1972